

全電子第一原理 GW +Bethe-Salpeter 法の開発と応用

Title: All-electron first-principles GW +Bethe-Salpeter method

野口良史、杉野修

Yoshifumi Noguchi and Osamu Sugino

東京大学物性研究所

Institute for Solid State Physics, The University of Tokyo

多体摂動論に基づくグリーン関数法は、励起スペクトルを高精度で求めることのできる第一原理計算手法である。しかし密度汎関数理論 (DFT) に基づいた通常の第一原理計算に比べて膨大な計算コストが必要になることから、取り扱うことができる系は少数原子系に限られてしまう。この問題を解決するには、近年のスーパーコンピュータの計算機資源を最大限活用するためにプログラムを大規模並列計算向けに開発することである。幸いにもグリーン関数法は大規模並列計算に非常に適した手法であり、並列効率を著しく低下させる要因は一切存在しない。

近年、全電子混合基底法プログラムに実装されている GW +Bethe-Salpeter 法を MPI 並列化することに成功した。右の図に、Fujitsu FX10@東京大学情報基盤センターで GW 計算の並列効率を測定したベンチマーク結果を示す。MPI_ALLREDUCE などの集団通信を MPI プロセス数繰り返す処理を行っているために、MPI プロセス数を増やすと並列効率は確実に低下するものの 1,536MPI 実行時でも約 97%の並列効率を達成できていることが確認できた。プログラムを MPI 並列化したことにより、日常的に使用することのできる計算機資源でも約 100 原子程度の系を取り扱うことができるようになった。

本研究では、全電子混合基底法プログラムを $M^+@C_{60}$ ($M=H, Li, Na, \text{ and } K$) の光吸収スペクトル計算に適応した[1]。本発表では、ポテンシャルエネルギー面などの原子構造の安定性に関する議論をするとともに、Bethe-Salpeter 法により計算された光吸収スペクトルを実験と比較を行い、 C_{60} 分子に内包された M^+ イオンが光吸収スペクトルに及ぼす影響などを詳細に議論する予定である。

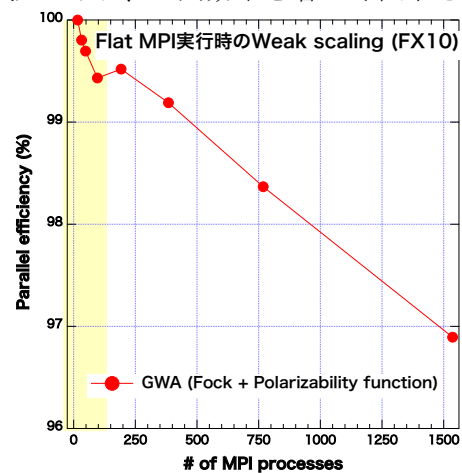


図1 : Weak scaling で測定した GW 計算の並列効率。96MPI 実行 (黄色の背景) までは1次元形状で、それ以上では3次元形状でノードを確保している。

[1] Y. Noguchi, O. Sugino, H. Okada, and Y. Matsuo, submitted to J. Phys. Chem. C.